

Применение метода главных компонент для классификации углерод-минеральных материалов

Е.Н. Терехова¹, *А.П. Комов², И.В. Власова²

¹Институт проблем переработки углеводородов СО РАН,
Российская Федерация, 644040, г. Омск, ул. Нефтезаводская, 54

²ФГБУ ВО Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Российская Федерация, 644077 г. Омск, пр. Мира, 55

*Адрес для переписки: Комов Александр Петрович, E-mail: a.p.komov@chemomsu.ru

Поступила в редакцию 28 апреля 2018 г., после доработки – 25 июня 2018 г.

Сапропели – многослойные отложения, скапливающиеся на дне пресных водоёмов. Они представляют собой сложные многокомпонентные системы, содержащие органическую и минеральную части. Сапропели непрерывно накапливаются в водоёмах. Широкие возможности применения сапропелей вызывают интерес к изучению их свойств, способов обработки и переработки как самих сапропелей, так и полученных на их основе новых материалов. В данной работе изучена возможность хеометрической классификации углерод-минеральных материалов, полученных путем прокалывания в атмосфере аргона сапропелей двух типов – органического и минерального, а также продуктов кислотной, щелочной и паровой обработки исходных углерод-минеральных материалов. Для хеометрической обработки данных в работе использован метод главных компонент – наиболее распространённый хеометрический алгоритм, применяемый не только сам по себе, но и дающий основу ряду других аналогичных методов. Основной принцип данного метода – декомпозиция матрицы исходных данных с получением произведения матриц счетов и нагрузок. В качестве исходных данных для проведения классификации образцов углерод-минеральных материалов и продуктов их переработки использованы физико-химические показатели и данные о содержании ряда элементов в изучаемых образцах. Показано, что при классификации образцов с использованием даже неполного набора данных любого типа, а также их различных комбинаций наблюдается чёткое деление на группы по природе исходного сапропеля. На основании полученных результатов сделан вывод о возможности предсказания некоторых характеристик углерод-минеральных материалов с помощью метода главных компонент по результатам более простых и быстрых измерений.

Ключевые слова: метод главных компонент, классификация образцов, углерод-минеральные материалы, сапропель.

For citation: *Analitika i kontrol'* [Analytics and Control], 2018, vol. 22, no. 3, pp. 327-333

DOI: 10.15826/analitika.2018.22.3.002

Carbon-mineral materials classification by principal component analysis

E.N. Terekhova¹, *A.P. Komov², I.V. Vlasosa²

¹Institute of Hydrocarbons Processing SB RAS Russian Federation, 644040, Omsk, ul. Neftezavodskaya, 54

²F.M. Dostoevsky Omsk State University, Russian Federation, 644077, Omsk, ul. Mira, 55

*Corresponding author: Aleksandr P. Komov, E-mail: a.p.komov@chemomsu.ru

Submitted 28 April 2018, received in revised form 25 June 2018

Sapropels are multilayer deposits accumulating on the bottom of fresh water bodies. They are complex multicomponent systems containing both organic and mineral parts. The wide possibilities of using sapropels cause interest in studying their properties, processing methods and new sapropel-based materials. The specialized Sapropel Committee was established at the beginning of the last century. It carries out a large amount of work related to the study and processing of sapropels. In this paper we study the possibility of applying chemometric algorithms for the classification of carbon-mineral materials obtained by calcination of

organic and mineral sapropels in an argon atmosphere, as well as products of acidic, alkali and steam treatment of initial carbon-mineral materials. For the chemometric data processing the principal component analysis is chosen as one of the most widely used chemometrical algorithms. In addition to the direct application, the principal component analysis serves as the basis for a group of other analogous chemometric algorithms. It is based on the decomposition of the initial data matrix into scores and loadings matrixes. In this paper, carbon-mineral materials chemometric classification possibilities by their physicochemical characteristics and elemental composition are studied. It is shown that carbon-mineral materials can be classified by initial sapropel type using any type of incomplete data set as well as data sets of various combinations. Based on the obtained results, it is concluded that it is possible to predict certain characteristics of carbon-mineral materials with use of the principal component analysis from the results of simpler and faster measurements.

Keywords: principal component analysis, samples classification, carbon-mineral materials, sapropel.

Введение

Сапропели представляют собой отложения на дне озёр и являются многокомпонентными полидисперсными органическими или органо-минеральными системами сложного состава. Накопление сапропеля в озёрах происходит постоянно. В России интерес к сапропелю возник еще в начале прошлого века, когда в 1919 году был создан Сапропелевый комитет, и за годы его существования (1919-1932 гг.) был выполнен большой объем научно-исследовательских и прикладных работ по изучению сапропелей и получению из них множества ценных продуктов. Примерно в те же годы была предложена классификация сапропелей, в основе которой лежит содержание золы. В соответствии с этой классификацией можно выделить три основных класса: органические сапропели (менее 30 % золы), органо-минеральные сапропели (30-65 % золы) и минеральные сапропели (65-88 % золы) [1]. Такой подход к классифицированию сапропелей применяется до сих пор, с последующими подразделениями по преобладающему содержанию растительных или животных остатков и составу минеральной части; по биологическому составу органической массы; по соотношению органической и минеральной части; по составу зольной части и др. [2, 3]. Стоит отметить, что используемая в нашей работе классификация не является единственной и отличается от официальной, приведённой в ГОСТ Р 54000-2010 «Удобрения органические. Сапропели. Общие технические условия».

В настоящее время сапропели достаточно активно изучают инструментальными методами [4-7], определяют их физические показатели [4, 8], текстурные характеристики [8], антиокислительные свойства [9] и биологическую активность [10]. В ходе термической обработки сапропелей получают макропористые углерод-минеральные материалы (УМ), которые представляют интерес как сорбенты для очистки вод от тяжелых металлов, нефтепродуктов, а также как носители в производстве катализаторов [4]. Последующая химическая обработка УМ позволяет получать материалы с разными физико-химическими свойствами [11], что в дальнейшем будет определять область применения УМ, поэтому важно уметь провести такую классификацию УМ, которая бы учитывала и физико-химические свойства УМ, и тип исходного сапропеля.

Для хеометрической обработки исходных данных был выбран метод главных компонент (МГК). Его основной принцип – декомпозиция матрицы исходных данных на произведение матрицы счетов и нагрузок с целью понижения размерности исходных данных. Более компактно изложенные данные удобны в обработке и визуализации. МГК удобен тем, что полученные результаты визуализированы в виде графиков счетов и нагрузок. По распределению точек, соответствующих образцам, на графике счетов в координатах главных компонент (как правило, ГК1 и ГК2) можно судить, представляет ли данная группа образцов единую совокупность или разбивается на подмножества. По графику нагрузок судят, какие именно переменные в наибольшей степени влияют на взаимное расположение образцов, а значит, и на их классификацию [12].

МГК широко применяется в настоящее время, в том числе и в ненаучных целях. В работе [13] авторы использовали МГК для визуализации и поиска скрытых закономерностей при классификации образцов нефти по месторождениям на основе стандартных показателей качества, таких как, например, плотность или массовая доля серы. Авторы работы [14] приводят результаты групповой классификации образцов минеральных вод по вольтамперометрическим данным. В этой работе использован один из вариантов МГК – SIMCA.

Набор исходных данных должен быть оптимальным, и его подбор имеет большое значение [12, 15]. Полученная классификация не будет сопоставима по точности с результатами прямых анализов, однако позволит на начальном этапе выбирать наиболее подходящие образцы для проведения дальнейших исследований прямыми методами. В некоторых случаях применения УМ не требуется знать характеристики образцов с высокой точностью, а значит результаты классификации МГК можно использовать непосредственно.

Цель данной работы – изучение возможностей классификации УМ по данным об элементном составе и физико-химическим характеристикам с помощью МГК и сравнение полученных результатов. Близость классификаций, полученных по разным наборам данных, позволит предсказывать сложные в определении показатели по более простым.

Экспериментальная часть

В качестве объектов исследования использовали два углерод-минеральных материала, полученные из сапропелей месторождений Омской области, относящихся к органическому (О) с содержанием золы 30.2 %, и минеральному типу (М), с содержанием золы 64.3 %. Характеристики исходных сапропелей приведены в табл. 1.

Карбонизацию сапропелей проводили в среде аргона при 600 °С в течение 30 минут со скоростью нагрева 5 °С/мин.

При модифицировании исходные образцы (УМО-и, УММ-и) подвергали кислотной и щелочной обработкам. Для этого образцы обрабатывали 5 М раствором азотной кислоты (УМО-к, УММ-к) или 2 М раствором гидроксида натрия (УМО-щ, УММ-щ) соответственно, при кипячении, после чего отмывали дистиллированной водой до нейтральной реакции. Процесс активации УМ перегретым водяным паром (УМО-п, УММ-п) проводили при объемной скорости подачи воды в пароперегреватель 2 см³/мин и температуре 850 °С. Более подробно методики модифицирования описаны в работе [16].

Элементный состав исследуемых образцов определяли на анализаторе Vario El Cube (C, H, N, S) и ИСП-АЭС спектрометре Varian 710-ES (Al, Ca, Fe, Si).

Насыпную плотность образцов (ρ) определяли по ГОСТ 16190-70 «Сорбенты. Метод определения насыпной плотности»; зольность (A^{daf}) – по ГОСТ 11022-95 «Топливо твердое минеральное. Методы

определения зольности»; суммарный объем пор по воде ($V_{\text{пор}}$) по ГОСТ 17219-71 «Угли активные. Метод определения суммарного объема пор по воде».

Исследование текстурных характеристик образцов проводили с использованием метода низкотемпературной адсорбции азота на приборе «Sorptomatic 1900». Перед проведением адсорбционных измерений образцы вакуумировали при 300 °С в течение 6 часов до остаточного давления не более 0.1 Па. Удельную поверхность образцов рассчитывали по методу БЭТ в интервале относительных давлений азота $P/P_0 = 0.05-0.25$.

Хемометрическую обработку данных вели с использованием ПО CAMO Unscrambler.

Результаты и обсуждение

Для проведения классификации образцов было необходимо оценить специфичность полученных данных. Так, если значения показателя внутри группы мало меняются, а различие в значениях этого показателя между группами велико, считают, что показатель обладает высокой специфичностью. По предварительной оценке, такими высокоспецифичными показателями из числа данных элементного состава могут быть содержания углерода, кремния, азота и водорода (табл. 2). Обработка кислотой, щелочью или паром по-разному влияет на содержание разных элементов. Независимо от типа исходного образца УМ, кислотная обработка снижает содержание кальция, алюминия и железа, щелочная об-

Таблица 1

Характеристики исходных сапропелей.

Table 1

Initial sapropels characteristics

Образец	A^{daf} , %	Содержание, %								
		C	H	N	S	O	Al	Ca	Fe	Si
О	30.2	35.20	1.20	2.50	1.70	59.40	5.32	1.71	1.34	29.77
М	64.3	43.52	6.55	20.61	1.17	28.15	5.97	3.36	1.64	59.59

Таблица 2

Элементный состав углерод-минеральных материалов, % мас.

Table 2

Carbon-mineral materials elemental composition, % w

Образец	Содержание элементов, % мас.							
	C	H	N	S	Al	Ca	Fe	Si
УММ-и	9.6	0.4	0.5	1.1	4.7	2.1	2.8	50.8
УММ-к	10.6	0.7	0.8	0.5	2.9	0.4	0.7	-
УММ-щ	8.6	1.0	0.5	0.2	4.3	4.7	2.7	49.6
УММ-п	5.1	0.05	0.1	0.7	5.2	3.8	3	-
УМО-и	35.2	1.2	2.5	1.7	3.7	2.3	2.6	31.2
УМО-к	36.3	1.6	3.9	1.1	2.6	0.8	1.5	-
УМО-щ	37.4	1.7	2.9	1.1	3.7	1.5	2.7	25.0
УМО-п	32.8	0.5	0.02	0.04	4.0	5.1	3.0	-

Примечание: (-) – не определяли.

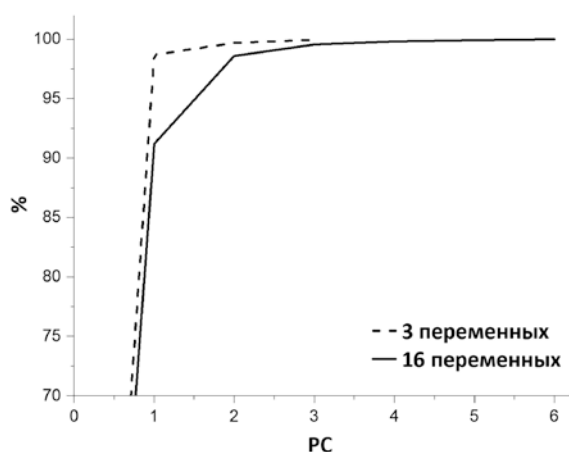


Рис. 1. График зависимости объяснённой дисперсии от количества главных компонент

Fig. 1. Explained variance – number of principal components diagram

работка – содержание кремния, а обработка паром ведет к заметному снижению «органической» доли – содержания углерода, водорода, азота и серы. Таким образом, можно предположить, что данные элементного состава позволят разделить образцы в пространстве главных компонент именно по типу исходного сапропеля, а не по способу обработки УМ.

Во всех случаях для классификации образцов было достаточно двух главных компонент. На рис. 1 представлен график зависимости объяснённой дисперсии от количества главных компонент для трёх (содержания углерода, кремния и кальция) и 16-ти (данные табл. 2 и 3) показателей. Как видно из графика, даже во втором случае использование двух главных компонент позволяет достичь 98.6 % объяснённой дисперсии.

Проведенная методом главных компонент классификация УМ по элементному составу подтвердила сделанные предположения. Полученные графики счетов и нагрузок приведены на рис. 2(а) и 2(б) соответственно. ГК1 объясняет 94 %, ГК2 – 5 %. На графиках видно чёткое деление образцов

УМ на группы в соответствии с типом исходного сапропеля вне зависимости от дальнейшей обработки. Наибольшее влияние на распределение образцов в пространстве главных компонент оказывают, как и предполагалось, углерод и кремний, а также кальций. График счетов, построенный с использованием содержаний только этих трёх элементов, имеет вид, практически идентичный рис. 2(а). ГК1 в данном случае объясняет 96 %, ГК2 – 4 %.

На втором этапе для классификации УМ использовали их физико-химические характеристики (табл. 3). Видно, что исследованные УМ в зависимости от типа исходного сапропеля имеют разные показатели зольности A^{daf} , насыпной плотности ρ , удельной поверхности $S_{БЭТ}$. Щелочная, кислотная и паровая обработки УМ приводят к разным изменениям текстуры поверхности, что связано с природой исходных сапропелей.

Кислотная активация вызывает увеличение общей площади поверхности за счёт микропор и уменьшение зольности за счёт частичного удаления катионов щелочных и щелочноземельных металлов, а также других компонентов минеральной матрицы. При щелочной обработке удаляются неразложившиеся гуминовые вещества и, в меньшей степени, катионы кремния. Это приводит к увеличению доли микро- и мезопор за счёт снижения доли макропор. Зольность и насыпная плотность при этом значительно не изменяются. Активация паром вызывает увеличение зольности, уменьшение суммарного объема пор и изменение общей поверхности за счёт изменения пористой структуры образцов.

График счетов, полученный с использованием всех физико-химических показателей, представлен на рис. 3(а). Как видно из рисунка, физико-химические показатели также позволяют разделять образцы УМ, прошедшие различную обработку, на группы по типу исходного сапропеля. При этом ГК1 объясняет 94 % данных, ГК2 – 5 %. Наибольшее влияние на распределение образцов оказывают A^{daf} и $S_{БЭТ}$. При использовании только этих двух показателей также наблюдается разделение образцов, но при

Таблица 3

Физическо-химические характеристики углерод-минеральных материалов

Table 3

Carbon-mineral materials physicochemical characteristics

Образец	A^{daf} , %	ρ , г/см ³	$V_{пор}$, см ³ /г	$V_{адс}$, см ³ /г	Доли пор, %			$S_{БЭТ}$, м ² /г
					микро	мезо	макро	
УММ-и	87.5	0.86	0.23	0.16	0	63	37	62
УММ-к	80.5	0.62	0.31	0.25	12	60	28	232
УММ-щ	80.2	0.78	0.30	0.22	5	73	22	129
УММ-п	94.1	0.77	0.21	0.14	1	78	21	62
УМО-и	53.5	0.50	0.32	0.19	6	50	44	123
УМО-к	42.9	0.54	0.19	0.17	21	40	39	174
УМО-щ	47.7	0.53	0.35	0.25	15	59	26	214
УМО-п	60.1	0.53	0.21	0.22	26	60	14	312

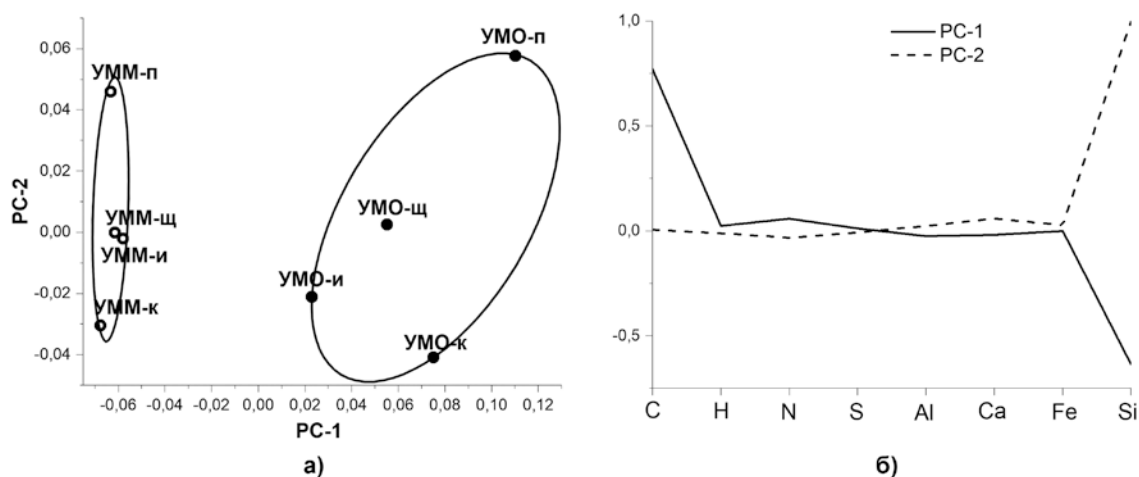


Рис. 2. Графики счетов (а) и нагрузок (б), построенные по данным о содержании всех элементов
Fig. 2. Scores (a) and loadings (b) graphs by all elemental composition data

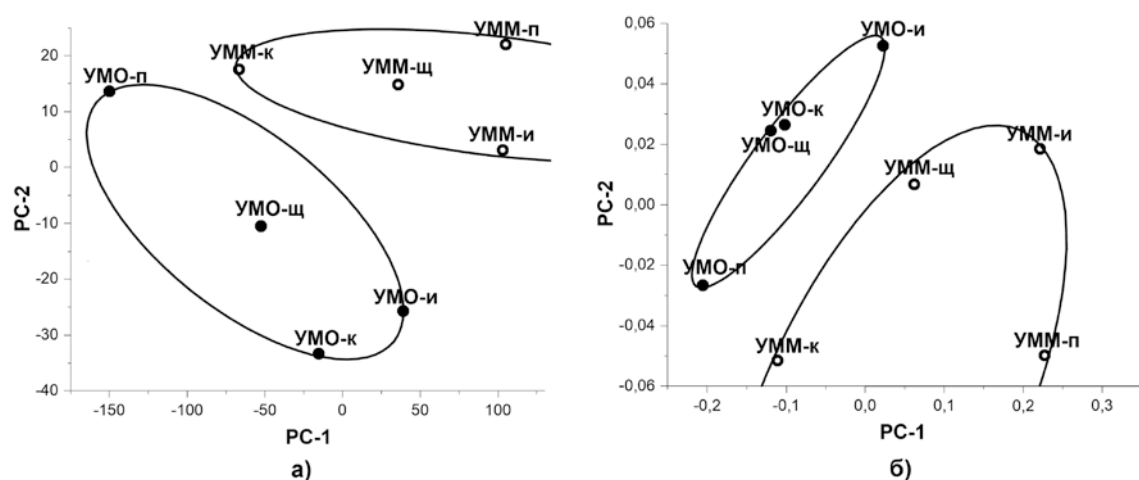


Рис. 3. График счетов, построенный с использованием всех физических показателей (а), и с использованием двух показателей - A^{daf} и S_{BET} (б)
Fig. 3. Scores graph with use of all physical characteristics and with the use of A^{daf} and S_{BET} only

этом увеличивается разброс для УММ — рис. 3(б); ГК1 95 %, ГК2 5 %.

Третьим этапом стало изучение возможности совместного использования данных элементного состава и физико-химических характеристик (табл. 2 и табл. 3). На рис. 4 приведён график нагрузок, из которого следует, что наибольшее влияние на классификацию по ГК 1 оказывает S_{BET} . В паре к ней нужно подобрать показатель, влияющий на распределение по ГК 2. Такими показателями могут быть A^{daf} , содержание углерода и кремния, доли мезо- и макропор.

Первые три показателя сильно коррелируют между собой (табл. 4). Из них наиболее легко определить A^{daf} и содержание углерода. На рис. 5 приведён график счетов, полученный при использовании этих показателей (ГК1 94 %, ГК2 6 %).

Образцы также группируются по типу исходного сапропеля, что логично, так как в основу использованной в данной работе классификации положена зольность.

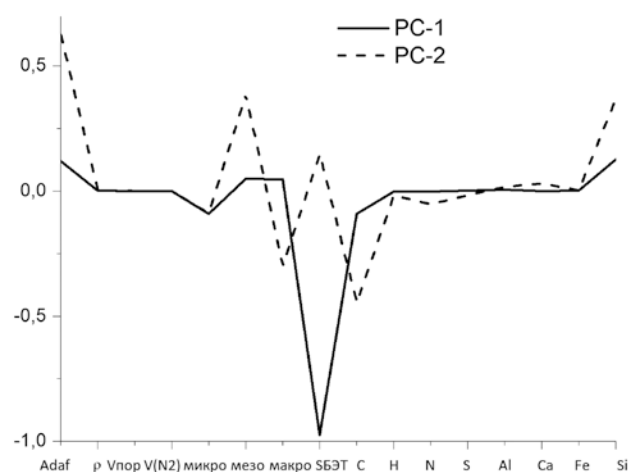


Рис. 4. График нагрузок, построенный с использованием физико-химических показателей и элементного состава
Fig. 4. Loadings graph with use of physicochemical characteristics and elemental composition

Таблица 4

Коэффициенты корреляции важнейших показателей

Table 4

Correlation coefficient for primary characteristics

Характеристики	Мезо поры	Макро поры	A^{daf}
Макро поры	-0,65	-	-
A^{daf}	0,83	-0,31	-
$S_{БЭТ}$	-0,33	-0,43	-0,51

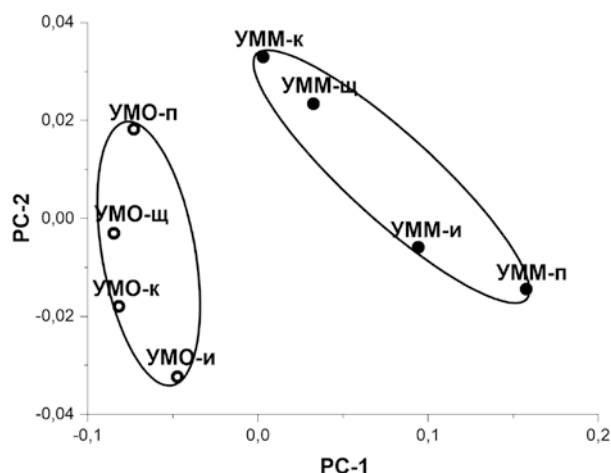


Рис. 5. График счетов, построенный с использованием зольности и содержания углерода

Fig. 5. Scores graph with use of A^{daf} and carbon content

При этом стоит отметить, что внутри обеих групп характерно смещение образцов с высокой $S_{БЭТ}$ вверх, а с низкой – вниз, несмотря на отсутствие данного параметра в исходном наборе данных.

Данная закономерность позволит предварительно предсказывать ориентировочные значения $S_{БЭТ}$ по значительно более простым в определении A^{daf} и содержанию углерода с последующей хемометрической обработкой.

Выводы

Таким образом, при изучении возможности классификации УМ по различным показателям выявлено, что методом главных компонент удаётся надёжно классифицировать образцы УМ по типу использованного для их получения сапропеля, вне зависимости от проведённой последующей обработки. Классификация наблюдается при использовании как данных по элементному составу, так и по физико-химическим показателям, а также при комбинации этих данных. Показана возможность предсказания $S_{БЭТ}$ по результатам более простых определений.

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания ИППУ СО РАН в соответствии с Програм-

мой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы по направлению V.46, проект № V.46.4.4., этап 2 (номер госрегистрации в системе ЕГИСУ НИОКТР АААА-А17-117021450098-2).

Физико-химические исследования исходных материалов и опытных образцов проведены с использованием приборной базы Омского регионального центра коллективного пользования СО РАН, г. Омск.

Acknowledgements

The work was carried out according to the state task of the IHP SB RAS (project registration number АААА-А17-117021450098-2).

The work was performed using the facilities of the Omsk Regional Shared Equipment Center SB RAS.

ЛИТЕРАТУРА

1. Стеклов Н. А., Ильина Е. Д. Сапропель и его использование в народном хозяйстве. М.: Недра. 1969. 176 с.
2. Лопотко М. З., Евдокимова Г. А., Кузьмицкий П. Л. Сапропели в сельском хозяйстве. Мн.: Навука і тэхніка, 1992. 216 с.
3. Штин С.М. Озерные сапропели и их комплексное освоение. М.:МГГУ, 2005. 373 с.
4. Кривонос О., Плаксин Г., Носенко В. О химическом составе сапропелей Омской области // Химия растительного сырья. 2014. Т. 3. С. 271-278.
5. Определение химического состава сапропеля / Адева Л. Н. [и др.] // Известия высших учебных заведений. Серия Химия и химическая технология. 2009. Т. 52, № 3. С. 121-123.
6. Рыжова Г. Л., Тюнина М. А., Дычко К. А. Определение жирных кислот в продуктах вибромагнитной переработки сапропеля методом хромато-масс-спектрометрии // Журнал аналитической химии. 2013. Т. 68, № 8. С. 736–742.
7. Химический состав и окислительные свойства жидких продуктов термической переработки сапропелей / Ноздрунова А. А. [и др.] // Химия растительного сырья. 2008. Т. 4. С. 141–146.
8. Кривонос О.И., Терехова Е.Н., Плаксин Г.В. Исследование влияния предварительной химической обработки сапропелей на свойства и текстурные характеристики углерод-минеральных материалов // Химия в интересах устойчивого развития. 2015. Т. 23, № 4. С. 355-360.
9. Хасанов В., Большаков А., Рыжова Г. Антиокислительные свойства природных пелоидов // Химия растительного сырья. 2006. Т. 3. С. 53-54.
10. Параметры оценки биологической активности органического вещества сапропелей / Юдина Н. В. [и др.] // Химия растительного сырья. 1998. Т. 4. С. 33–38.
11. Получение пористых углерод-минеральных материалов методом химической обработки продуктов карбонизации сапропеля / Терехова Е. Н. [и др.] // Журнал прикладной химии. 2017. Т. 90, № 12. С. 1663-1670.
12. Эсбенсен К. Х. Многомерный анализ данных – в практике. 4-е издание: сокр. пер. с англ. М.: ИПХФ РАН, 2005. 160 с.
13. Лобачев А.Л., Фомина Н.В., Монахова Ю.Б. Идентификация нефтей Самарской области с использованием метода главных компонент и факторного дискриминант-

ного анализа // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Химия. Биология. Экология. 2015. Т. 15, № 1. С 23-27.

14. Идентификация многокомпонентных водных растворов с использованием вольтамперометрической системы трубчатых электродов / Сидельников А. В. и др. // Вестник Башкирского университета. 2009. Т. 14, № 4. С 1343-1347.

15. Родионова О. Е., Померанцев А. Л. Хемометрика в аналитической химии [Electronic resource]. URL: <https://docplayer.ru/26218088-Hemometrika-v-analiticheskoy-himii.html> (дата обращения: 06.07.2018).

16. Терехова Е. Н., Лавренев А. В., Кривonos О. И. Влияние химической обработки на свойства углерод-минеральных материалов из сапропеля // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2016. Т. 56, № 8. С. 91-96.

REFERENCES

1. Steklov N.A., Il'ina E.D. *Sapropel' i ego ispol'zovanie v narodnom khoziaistve* [Sapropel and its use in the national economy]. M., Nedra. 1969. 176 p. (in Russian).

2. Lopotko M.Z., Evdokimova G.A., Kuz'mitskii P.L. *Sapropeli v sel'skom khoziaistve* [Sapropels in agriculture]. Minsk, Navuka i tekhnika, 1992. 216 p. (in Russian).

3. Shtin S.M. *Ozernye sapropeli i ikh kompleksnoe osvoenie* [Lake sapropels and complex development of them]. Moscow, MGГУ, 2005. 373 p. (in Russian).

4. Krivonos O.I., Plaksin G.V., Nosenko V.N. [About the chemical composition of sapropels in the Omsk region]. *Khimiia rastitel'nogo syr'ia* [Chemistry of plant raw materials], 2014, no. 3, pp. 271-278 (in Russian).

5. Adeeva L. N., Kovalenko T. A., Krivonos O. I., Plaksin G. V., Strunina N. N. [Sapropels chemical composition determination]. *Izvestiia vysshikh uchebnykh zavedenii. Seriia khimiia i khimicheskaiia tekhnologiia* [Russian Journal of Chemistry and Chemical Technology], 2009, no. 52(3), pp. 121-123 (in Russian).

6. Ryzhova G.L., Tyunina M.A., Dychko K.A. Determination of fatty acids in products of the vibromagnetic treatment of sapropel by chromatography-mass spectrometry. *Journal of Analytical Chemistry*, 2013, no. 68(8), pp.736-742. DOI: 10.1134/S1061934813080108

7. Nozdrunova A.A., Krivonos O.I., Vysokogorskii V.E., Plaksin G.V., Chernyshev A.K. [Chemical composition and oxidizing properties of liquid products of thermal processing

of sapropels]. *Khimiia rastitel'nogo syr'ia* [Chemistry of plant raw materials], 2008, no. 4, pp. 141-146 (in Russian).

8. Krivonos O.I., Terekhova E.N., Plaksin G.V. [Investigation of the Effect of Preliminary Chemical Treatment of Sapropel on the Properties and Texture Characteristics of Carbon-Mineral Materials]. *Khimiia v interesakh ustoichivogo razvitiia* [Chemistry for sustainable development], 2015, no. 23(4), pp. 355-360 (in Russian). DOI: 10.15372/KhUR20150404

9. Khasanov V.V., Bol'shakov A.L., Ryzhova G.M. [Antioxidant properties of natural peloids]. *Khimiia rastitel'nogo syr'ia* [Chemistry of plant raw materials], 2006, no. 3, pp. 53-54 (in Russian).

10. Iudina N.V., Pisareva S.I., Pynchenkov V.I., Loskutova Iu.V. [Parameters for assessing the biological activity of organic matter of sapropels]. *Khimiia rastitel'nogo syr'ia* [Chemistry of plant raw materials], 1998, no. 4, pp. 33-38 (in Russian).

11. Terekhova E.N., Lavrenov A.V., Shilova A.V., Kireeva T.V., Savel'eva G.G., Trenikhin M.V., Bel'skaia O.B. [Preparation of Porous Carbon-Mineral Materials by Chemical Treatment of Sapropel Carbonization Products]. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 2017, no. 90(12), pp. 1663-1670. DOI: 10.1134/S107042721712014X

12. Esbensen K.H. *Multivariate Data Analysis – In Practice*. 4th ed. Oslo, CAMO, 2000. 579 p. (Russ. ed.: Rodionova O. E. *Analiz mnogomernykh dannykh. Izbrannye glavy*. Moscow, IPKhF RAN, 2005, 160 p.).

13. Lobachev A. L., Fomina N. V., Monakhova Iu. B. [Identification of Samara region oils using principal component analysis and factor discriminant analysis]. *Izvestiia Saratovskogo universiteta. Novaia seriia. Seriia Khimiia. Biologiia. Ekologiia* [Saratov state University news] 2015. no. 15(1). pp 23-27.

14. Sidel'nikov A. V., Maistrenko V. N., Kudasheva F. Kh., Bikmeev D. M. [Identification of multicomponent water solutions using voltammetric system of tubular electrodes]. *Vestnik Bashkirskogo universiteta* [Bulletin of Bashkir University] 2009. no. 14 (4). pp 1343-1347.

15. Rodionova O.E., & Pomerantsev A.L. *Khemometrika v analiticheskoi khimii* [Chemometric in analytical chemistry]. Available at: <https://docplayer.ru/26218088-Hemometrika-v-analiticheskoy-himii.html> (accessed 06 July 2018).

16. Terekhova E.N., Lavrenov A.V., Krivonos O.I. [Effect of chemical treatment on properties of carbon-mineral materials from sapropel]. *Izvestiia vysshikh uchebnykh zavedenii. Seriia khimiia i khimicheskaiia tekhnologiia* [Russian Journal of Chemistry and Chemical Technology], 2016, no. 56(8), pp. 90-95 (in Russian).